



TITLE:

表紙・目次ほか

AUTHOR(S):

CITATION:

表紙・目次ほか. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム  
研究成果報告書 2017, 2016

ISSUE DATE:

2017-03

URL:

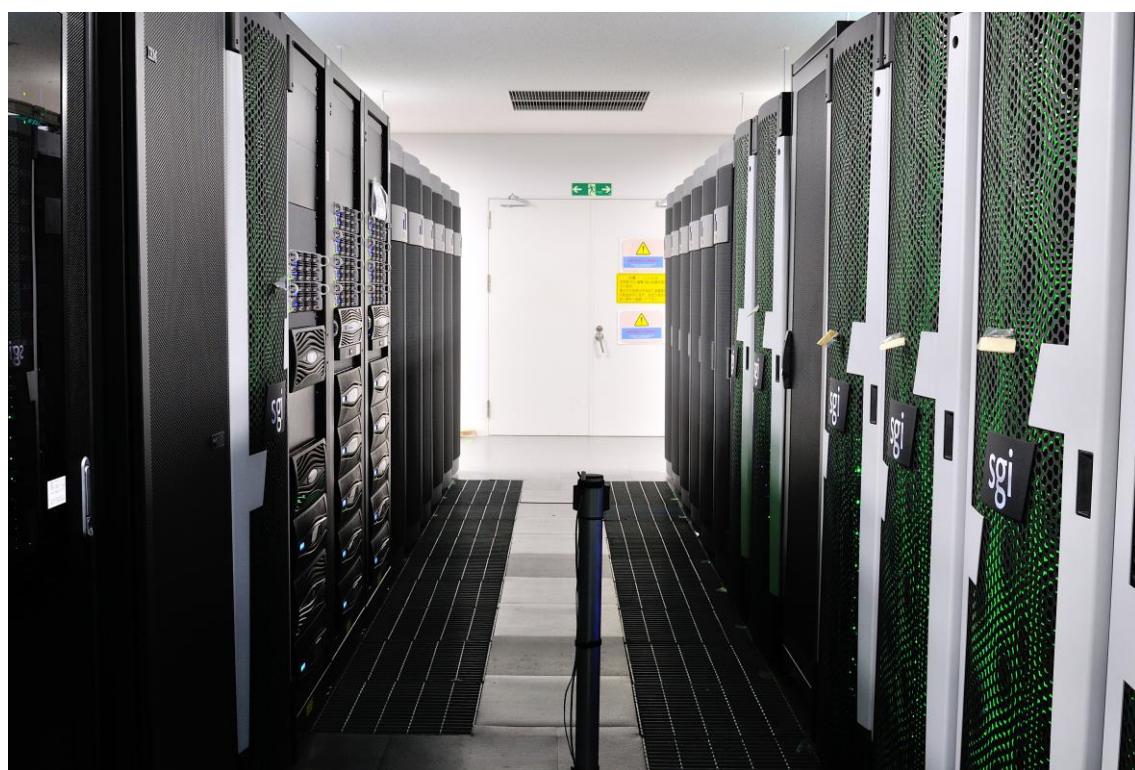
<http://hdl.handle.net/2433/227933>

RIGHT:

# スーパーコンピュータシステム

平成 28 年度

## 研究成果報告書



京都大学化学研究所

## はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992 年 1 月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2012 年 1 月に導入されたシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとして SGI UV1000 (総 CPU コア数 3,072) を、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとして Sun Fire X4800 (総 CPU コア数 768) を採用していました。2016 年 1 月には、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバは SGI UV2000 (総 CPU コア数 1,024) および SGI C2112 (総 CPU コア数 3,000) へ、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバは DELL PowerEdge R930 (総 CPU コア数 640) へと移行されました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<http://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、平成 28 年度の 365 名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、61 件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、平成 28 年度は 7 件の採択課題 (バイオ情報学分野) 推進に利用されました。

今後とも、スーパーコンピュータシステムをより良いものにしていくために、皆さまのご意見やご要望を以下のメールアドレスまでお寄せくださいますようお願い申し上げます。

送付先メールアドレス : [spradm@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:spradm@scl.kyoto-u.ac.jp)

2017 年 3 月

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター  
<http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>  
スーパーコンピュータシステム  
<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

## 化学研究所

特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	.....	1
リビングラジカル重合法を用いたボトルブラシの合成と高次構造の創製	榊原 圭太	.....	2
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察	登阪 雅聡	.....	3
次世代リビングラジカル重合制御剤の開発	中村 泰之	.....	4
含歪み $\pi$ 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	.....	5
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の研究	橋本 士雄磨	.....	6
たんぱく質間相互作用を制御する合成分子の創製	大神田 淳子	.....	7
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	.....	8
溶液および界面の振動分光学	長谷川 健	.....	9
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	.....	10
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖	.....	11
高効率有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と	中村 正治	.....	12
遷移金属錯体の構造探索	竹内 勝彦	.....	13
巨大DNAウイルスゲノムの解析	緒方 博之	.....	14
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	Blanc-Mathieu Romai	.....	16
ジャンボファージXacN1のゲノム解析	吉川 元貴	.....	17
バイオインフォマティクスの手法を用いたリパクレオン投与マウスの腸内細菌叢の解析	西山 拓輝	.....	18
ゲノムデータに基づく知識発見	黒西 愛	.....	19
メタゲノムの組成に基づく比較法の開発	荒巻 拓哉	.....	20
メガウイルス科のDNAポリメラーゼ遺伝子を標的とするアンプリコン解析	李 岩沢	.....	21
海洋メタゲノムから得られたウイルスゲノムの多様性に関する研究	西村 陽介	.....	22
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	.....	23
三角不等式を制約として考慮した整数計画法による中央文字列と中心文字列の厳密解法的高速化	林田 守広	.....	24
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析	清水 祐吾	.....	25
生体分子情報データベースの開発	五斗 進	.....	26
プロテオーム・データベースの構築	吉沢 明康	.....	27
新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	笹森 貴裕	.....	28
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	郭 晶東	.....	29
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明	鈴木 裕子	.....	30
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	.....	31
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	時任 宣博	.....	32
ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化と解析	田村 武幸	.....	33

## エネルギー理工学研究所

ナノ炭素細線物質に関する理論計算	中江 隆博	.....	34
------------------	-------	-------	----

## 防災研究所

海底圧力計を用いたヒクラング沈み込み帯における浅部スロー スリッピイベントの検出	村本 智也	.....	35
---	-------	-------	----

## 理学研究科・理学部

ソフトマターの相転移ダイナミクス	荒木 武昭	.....	36
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明	.....	37

## 工学研究科・工学部

触媒有機化学に関する研究	辻 康之	.....	38
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平	.....	39
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	.....	40
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之	.....	41
多孔性配位高分子の合成と性質	植村 卓史	.....	42
HOPG基板上における分子配列のモデリング	廣瀬 崇至	.....	43
HOPG基板上における分子配列のモデリング	西谷 暢彦	.....	44
HOPG基板上における分子配列のモデリング	前田 尚生	.....	45
分離プロセスの量子化学的研究	田門 肇	.....	46
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	.....	47
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移	田中 秀樹	.....	48
キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存 性らせん反転の機構解明	長田 裕也	.....	49

## エネルギー科学研究科

エネルギー機能材料の電子構造と光物性	蜂谷 寛	.....	50
軽金属・合金の力学特性	馬淵 守	.....	51
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高	.....	52

## 農学研究科・農学部

変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子	.....	53
------------------	-------	-------	----

## 人間・環境学研究科

有機分子性結晶の気体吸着状態の解析	津江 広人	.....	54
-------------------	-------	-------	----

長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析	上田 純平	.....	55
-----------------------	-------	-------	----

## 生態学研究センター

琵琶湖沖に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析	岡崎 友輔	.....	56
--------------------------	-------	-------	----

## 物質—細胞統合システム拠点

多能性細孔物質の深化	日下 心平	.....	57
------------	-------	-------	----

## 学際融合教育研究推進センター

高分子溶液の相分離に関する大規模なシミュレーション	吉元 健治	.....	58
---------------------------	-------	-------	----

## 京都大学以外

グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発	松井 求	.....	59
ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析	上田 敦史	.....	60
典型元素を活用した機能性材料の開発	吾郷 友宏	.....	61
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也	.....	62

## スーパーコンピュータシステム

システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也	.....	63
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	.....	70
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	.....	72
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴	福本 淳司	.....	90
平成28年度研究課題一覧		.....	95

京都大学化学研究所  
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

[spradm@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:spradm@scl.kyoto-u.ac.jp)

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp>